



Jeudi 6 avril 2023



Jeudis de la chimie du solide



Tanguy Le Bahers

Laboratoire de Chimie à l'ENS Lyon

Comment la chimie quantique peut nous renseigner sur le fonctionnement des photocatalyseurs

La recherche de meilleurs rendements en photocatalyse est la principale force motrice du développement de nouveaux matériaux pour cette application. La chimie théorique et particulièrement la chimie quantique contribuent activement à cette recherche. La chimie quantique (la DFT dans le cas présent) permet la simulation d'une riche palette de propriétés comme les constantes diélectriques (électroniques et vibrationnelles), les spectres d'absorption, les masses effectives ou encore les énergies de liaison d'exciton avec une bonne fiabilité si le niveau de calcul est correctement choisi. De plus, il est maintenant possible de simuler les réactions électrochimiques se déroulant à la surface des (co)catalyseurs au moyen de la DFT grand canonique. En d'autres termes, la DFT permet la compréhension fine des mécanismes de la photocatalyse et contribue à la conception de nouveaux photocatalyseurs. L'objectif de cette présentation est d'illustrer les succès de la DFT dans l'étude des photocatalyseurs mais aussi les défis qu'il reste encore à relever dans ce domaine. La communication sera organisée en trois parties.

Dans la première, le principe de fonctionnement d'un photocatalyseur hétérogène sera présenté en soulignant les propriétés clés que doit posséder un semiconducteur qui en découlent. Nous verrons ensuite la fiabilité de la DFT pour reproduire ces propriétés. Plusieurs familles de semiconducteurs seront passées en revue pour illustrer ces résultats : des oxysulfures (BiCuOS , BiAgOS) et des oxynitrides (SrTaO_2N).

Dans la seconde partie, nous nous intéresserons aux hétérojonctions entre des couches de matériaux lamellaires MoS_2 et MoO_3 (dopés). L'objectif est ici d'illustrer la possibilité de concevoir de nouvelles architectures ayant une structure électronique permettant de proposer des mécanismes de photocatalyse innovants. Ainsi, nous montrerons à partir de calculs DFT que les interfaces $\text{MoS}_2/\text{MoO}_3$ peuvent être considérées pour la photodissociation de l'eau à partir d'un mécanisme dit en Z.

La dernière partie de la présentation sera dédiée à la simulation des réactions électrochimiques sur des surfaces. Le principe de la DFT grand canonique sera présenté à partir du cas particulier de l'oxydation de l'eau sur une surface de CoOOH , un cocatalyseur développé pour la photodissociation de l'eau. Nous verrons comment la DFT permet de proposer des mécanismes réactionnels et ouvre des voies à l'optimisation des cocatalyseurs.



zoom

Codes de connexion accessibles à l'adresse

<https://new.societechimiquedefrance.fr/divisions/chimie-du-solide/jeudis-de-la-chimie-du-solide/>